

Sitohang, I.A., 2011, Pengaruh Basis Set Terhadap Energi Interaksi, Charge Transfer, dan Basis Set Supersition Error pada Ion Ni²⁺ dan Ion I Menggunakan Teori HF dengan Software G03W. Skripsi ini di bawah bimbingan Drs. Faidur Rochman, MS, dan Mochamad Zakki Fahmi, S.Si, M.Si, Departemen Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga, Surabaya

ABSTRAK

Pengaruh basis set terhadap energi interaksi, *charge transfer*, dan *basis set superposition error* pada ion Ni²⁺ dan ion I telah dikerjakan melalui pendekatan mekanika kuantum *ab initio* pada tingkat teori HF menggunakan program G03W. Basis set yang digunakan diunduh melalui internet, kemudian basis set tersebut digunakan untuk membuat *file input* yang akan menghasilkan *file output* yang diperoleh dengan melakukan *running software* G03W. Perbedaan penggunaan basis set untuk molekul ini akan mempengaruhi hasil yang didapat, sehingga pemilihan basis set yang baik akan memberikan hasil yang paling optimum. Terdapat 3 macam seleksi yang harus dilakukan untuk memperoleh pasangan basis set terbaik, yaitu seleksi berdasarkan energi interaksi, *charge transfer*, dan *Basis Set Supersition Error* (BSSE). Hasil analisa menunjukkan bahwa DeMon Coulomb Fitting, DGauss A1 DFT Coulomb Fitting, 6-311G, dan 6-311G* merupakan basis set terbaik berdasarkan nilai energi interaksi. Tidak terdapat basis set terbaik berdasarkan terjadinya *charge transfer* pada Ni²⁺ dan I. Selain itu, tidak ditemukan pasangan basis set terbaik berdasarkan nilai BSSE dan pola grafik yang mendekati nol pada sumbu X. Berdasarkan seluruh hasil data, pasangan basis set terbaik tidak ditemukan.

Kata kunci : Basis set, Ni²⁺, I, energi interaksi, charge transfer, Basis Set Supersition Error (BSSE), ab initio, HF.

Sitohang, I.A., 2011, Basis Set Effect Based On Interaction Energy, Charge Transfer, and Basis Set Supersition Error of Ni²⁺ Ion and Γ Ion Using HF Theory by G03W Software. This script below is supervised by Drs. Faidur Rochman, MS, and Mochamad Zakki Fahmi, S.Si, M.Si, Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Airlangga University, Surabaya.

ABSTRACT

Basis set effect based on interaction energy, charge transfer, dan basis set superposition error of Ni²⁺ ion and Γ ion has been carried out through ab initio quantum mechanics approach at HF level of theory using G03W software. Basis set that are used were downloaded through internet, then it is use to make input file that will produce output file that obtained by running G03W software. Difference of basis set usage in this molecule will affect the result that obtained so that the most appropriate use of basis set will be obtaining the most optimum result. There are three kinds of selection that must be done to obtain the best basis set that is selection of interaction energy, charge transfer, and Basis Set Supersition Error (BSSE). The result shows that DeMon Coulomb Fitting, DGauss A1 DFT Coulomb Fitting, 6-311G, dan 6-311G* are the best basis set based on interaction energy value. There is no best basis sets based on charge transfer on Ni²⁺ dan Γ. However, there is no best basis set are found based on BSSE value and chart patterns that approaching zero on X axis. Based on all of the result, there is no best basis set pairs are found.

Keyword : Basis set, Ni²⁺, Γ, interaction energy, charge transfer, Basis Set Supersition Error (BSSE), ab initio, HF.